

Компьютерное моделирование образования и роста оксидной пленки на поверхности ферритно-мартенситной стали под действием облучения

Выполнил Лужанский Н.В.
Научный руководитель Ганченкова М.Г.

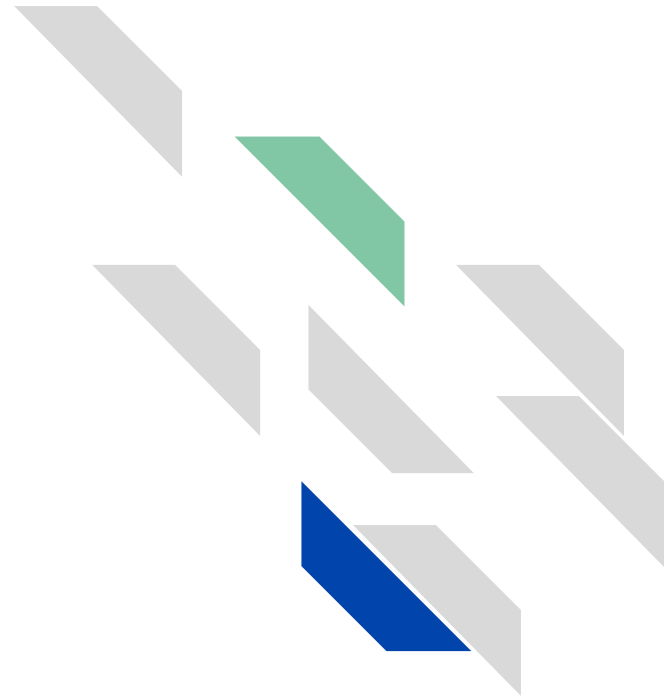


Цель работы

Теоретическое изучение особенностей взаимодействия кислорода с поверхностью ферритно-мартенситной стали, на начальных стадиях образования оксидной пленки на чистой поверхности металла и возможные эффекты воздействия облучения на этот процесс.

Раздел 1
Раздел 2
Раздел 3

Постановка задачи



Реактор БН

Реакторы по распространенности

• ВВЭР

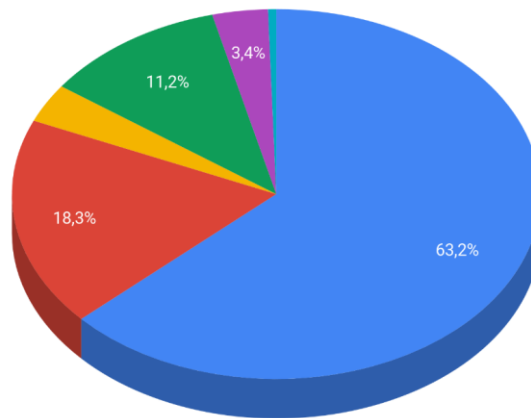
• BWR

• ГГР

• PHWR

• РБМК

• БН





Реактор БН

Особенности:

1. Возможно замкнуть цикл использования ядерного топлива;
2. В качестве теплоносителя используется высококипящий, радиационно стойкий свинцовый теплоноситель;
3. Отсутствие высокого давления в активной зоне.

Проблемы:

1. Каков оптимальный уровень кислородного потенциала в свинце?
2. Как будут вести себя оболочки ТВЭЛ-ов под облучением и в окружении расплавленного свинца?

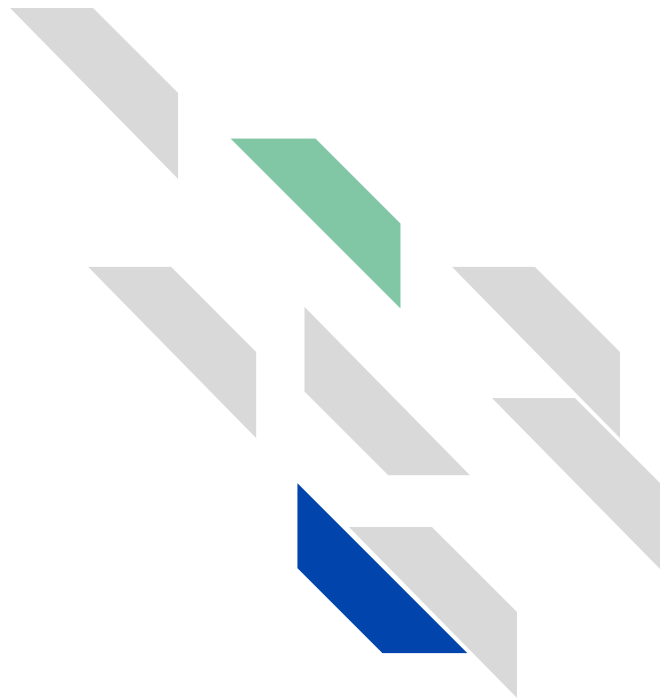
ЭП-823

Требования к материалу

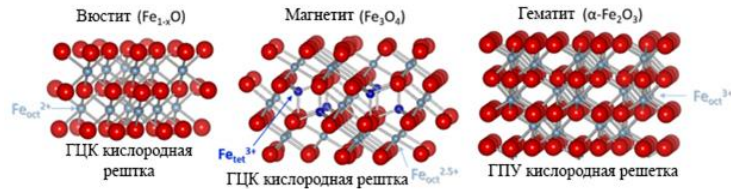
1. Коррозионная стойкость;
2. Радиационная стойкость;
3. Жаропрочность.

Марка стали	Содержание основных легирующих элементов, мас.%							
	C	Cr	Mo	V	W	Nb	B	Другие
16X12МВСБФР (ЭП-823)	0,14-0,18	10,0-12,0	0,6-0,9	0,2-0,4	0,7	0,2-0,4	0,0-0,6	0,5-0,8Ni; 1,1-1,3Si

Теория и эксперимент



Соединение железо-кислород



Оксиды железа на решетке с плотной упаковкой O_2 аниона с катионами металлов в октаэдрических и тетраэдрических координационных междоузлиях

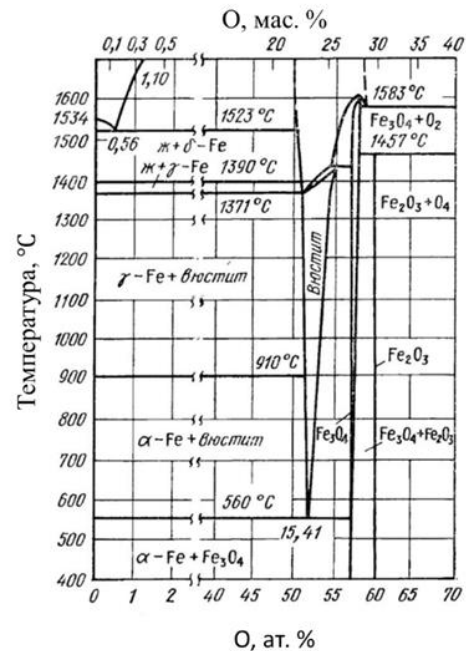
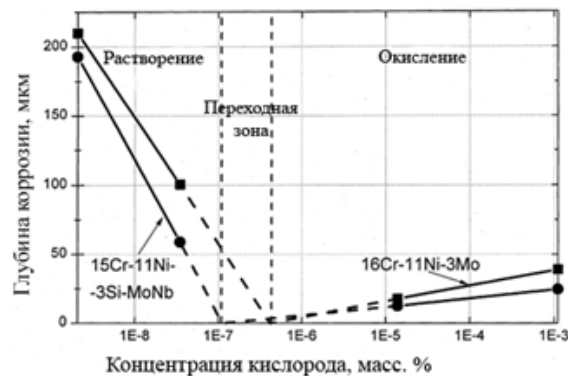


Диаграмма состояния Fe-O

Кислород в свинце

Если содержание кислорода ниже равновесного, то окисления не происходит и элемент взаимодействует со свинцом, в соответствии с диаграммой состояния для данного элемента, а если же содержание кислорода в свинце выше равновесного то элемент будет взаимодействовать со свинцом, создавая оксид.

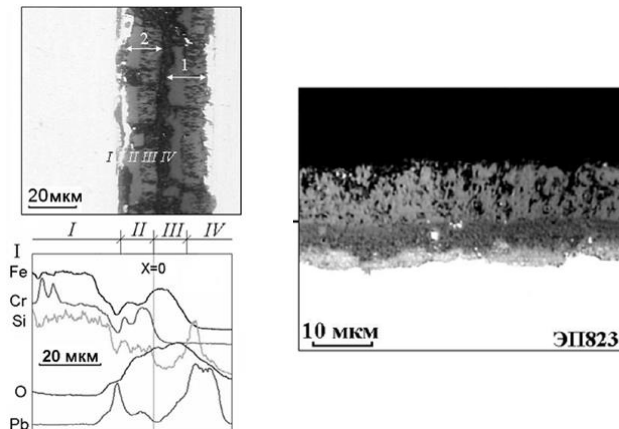


Коррозионное поведение стали в расплаве свинца после 3000 часов при температуре 550 °С.

Окисление ЭП-823

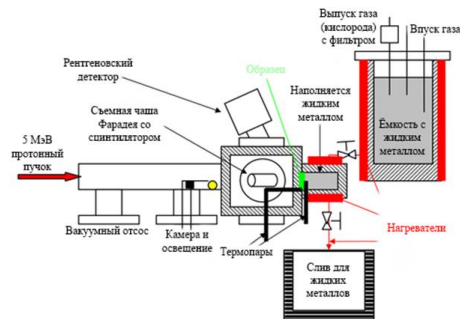
На поверхности стали ЭП823 формируется двухслойный оксид.

1. Зона III состоит в основном из железа и кислорода.
2. Зона II обогащена хромом.
3. Расплав проникает на границу раздела «оксид/матрица», и в матрице фиксируется двойной пик хрома (зона I)

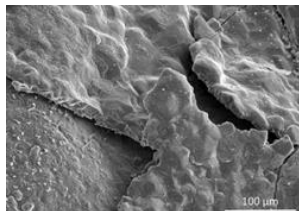


Снимок оксидной пленки на стали ЭП823
через 1100 часов и 2000 часов
нахождения в жидком свинце

Окисление стали под облучением



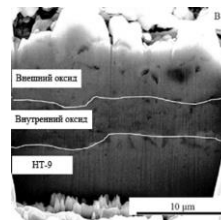
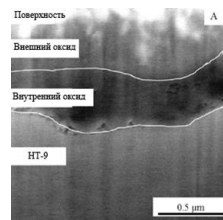
Схематическая иллюстрация экспериментальной установки



Отслоение оксидного слоя от поверхности образца

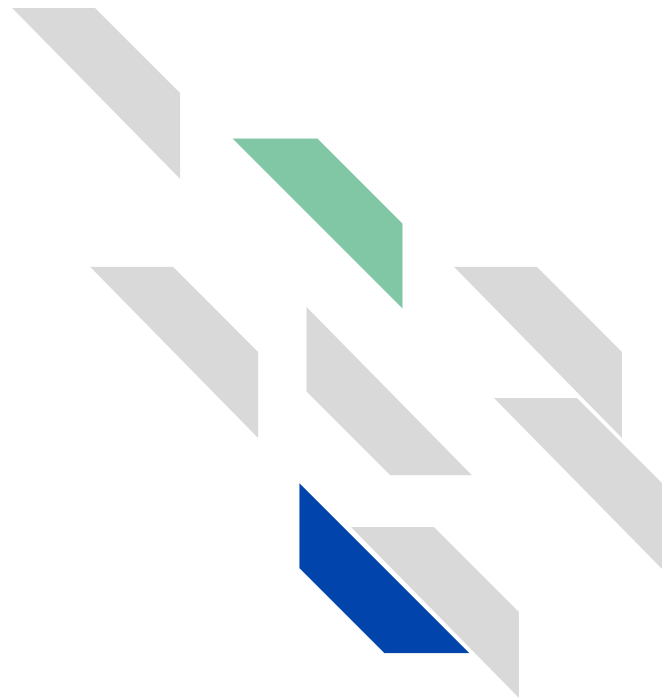


а – сторона пучка; б – сторона теплоносителя
Изображение образца после испытаний



а – не облученная зона; б – облученная
Сечение SEM-изображения многослойной оксидной структуры в образце

Методология



Молекулярная динамика и статика

Особенности молекулярной динамики:

1. Решаются уравнения Ньютона;
2. Используются многочастичные потенциалы;
3. Моделирование эволюционных процессов.

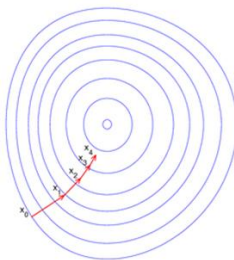
$$\vec{R}(t + \Delta t) = 2\vec{R}(t) - \vec{R}(t - \Delta t) + \vec{a}(t)\Delta t^2 + O(\Delta t^4)$$

$$\vec{v}(t) = \frac{1}{2}\Delta t(\vec{R}(t + \Delta t) - \vec{R}(t - \Delta t) + O(\Delta t^2))$$

$$\vec{a}(t) = -\frac{\nabla U(\vec{r})}{m}$$

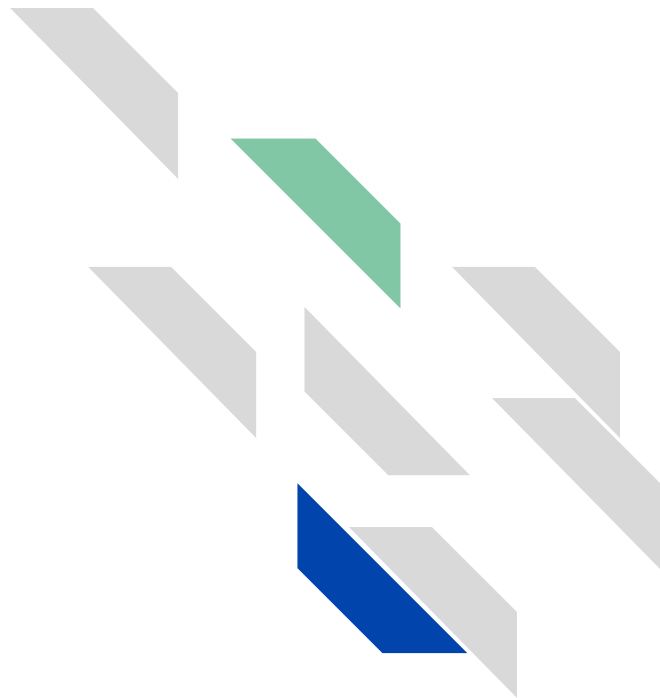
Особенности молекулярной статистики:

1. Используются алгоритмы минимизации;
2. Используются многочастичные потенциалы;
3. Моделируется конфигурация атомов при абсолютном нуле.

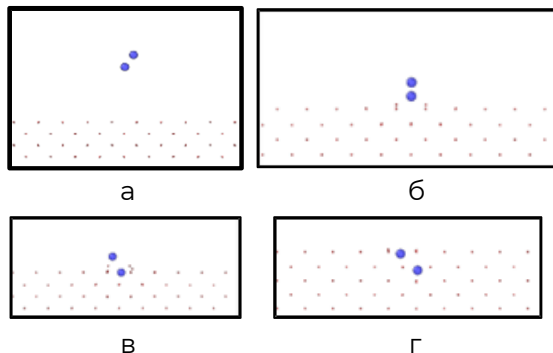


Последовательные приближения к точке экстремума в направлении наискорейшего спуска в случае дробного шага.

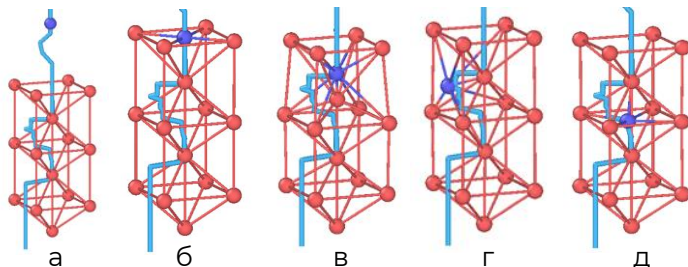
Компьютерный эксперимент



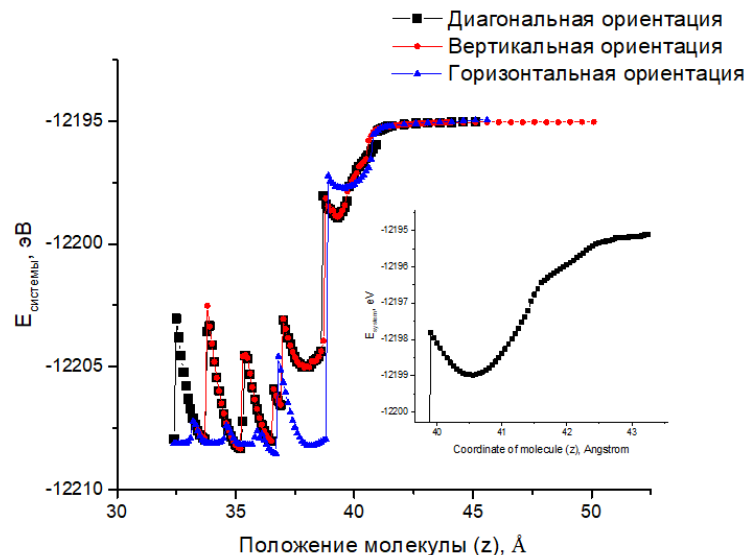
Молекулярная статика



Последовательные стадии продвижения кислорода в процессе моделирования.

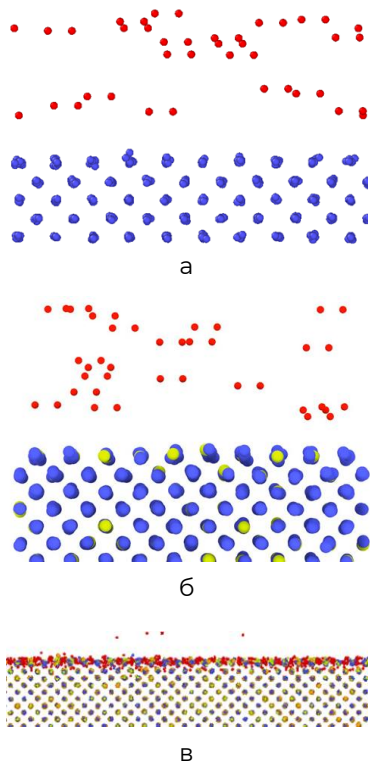


Перемещение атома кислорода в решетке.

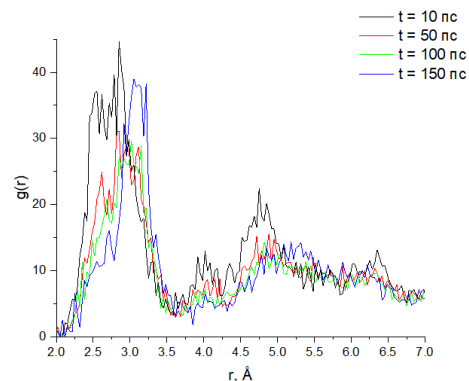


Зависимость энергии системы от расстояния смещаемого атома кислорода до первого слоя атомов железа для диагональной, горизонтальной и вертикальной начальной ориентации молекулы кислорода.

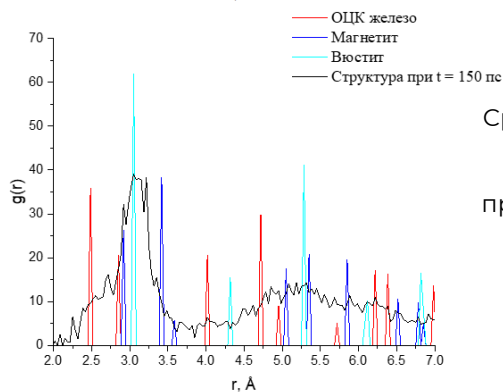
Молекулярная динамика. Окисление



Конфигурация атомов в расчетной ячейке при моделировании взаимодействия молекулярного кислорода с поверхностью.

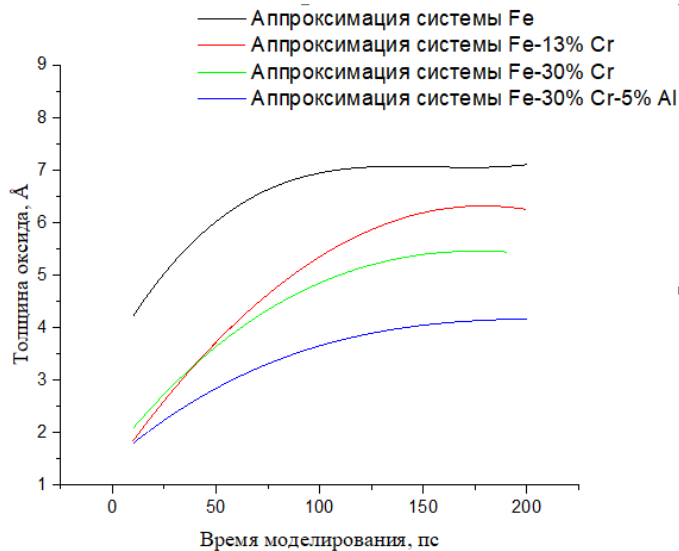


Функция радиального распределения типа Fe-Fe для атомов в приповерхностных слоях моделируемого кристаллита при различных временах моделирования

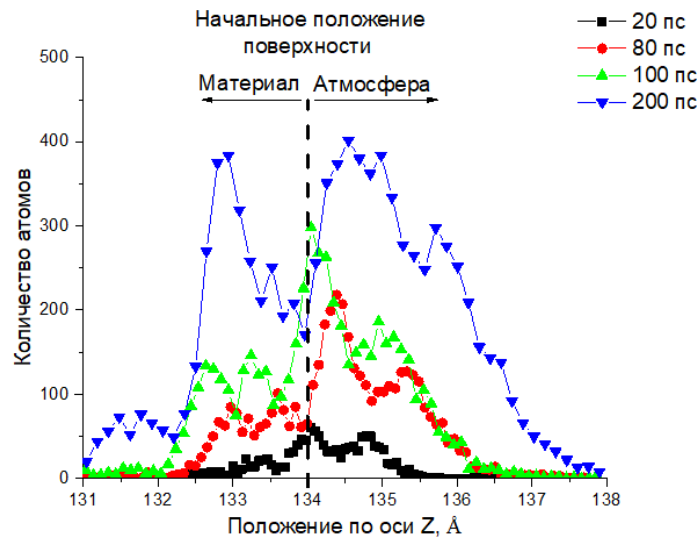


Сравнение данных структурного анализа приповерхностных слоев с референсными структурами

Молекулярная динамика. Окисление

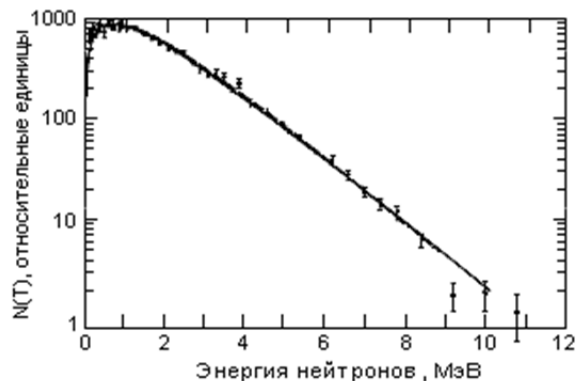


Сравнение аппроксимаций толщины оксидной пленки для систем железа без хрома, с хромом и с хромом и алюминием



Концентрация кислорода в приповерхностной зоне в различные моменты времени

Молекулярная динамика. Каскады



Спектр энергии нейтронов при
делении ^{235}U

$$T = \frac{4M_1M_2}{(M_1 + M_2)^2} E_0 \sin^2 \frac{\theta}{2}$$



$$T_{\text{макс}} = \frac{4M_1M_2}{(M_1 + M_2)^2} E_0 = 0.069 E_0$$

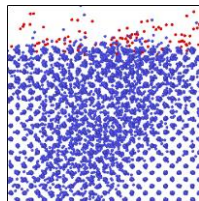


$$E_0 = 0.1 \div 1 \text{ МэВ}$$

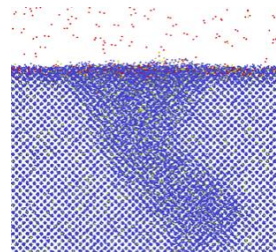
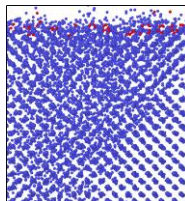


$$T_{\text{макс}} = 6,9 \div 69 \text{ кэВ}$$

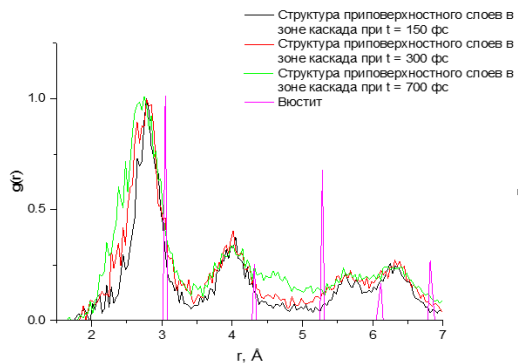
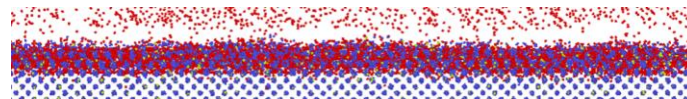
Молекулярная динамика. Каскады



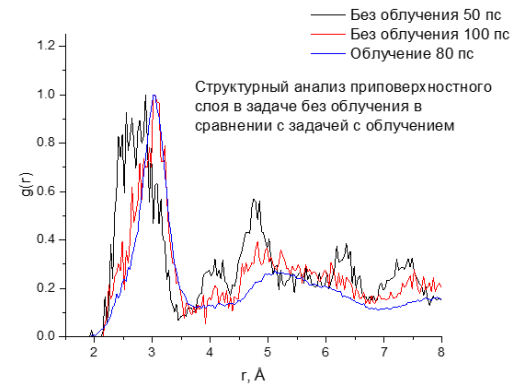
Развитие каскада от
первично выбитого
атома железа с
энергией 10 кэВ



Область каскада после
3 пс и 100 пс после
начала каскада.



Структурный анализ
железа после
прохождения каскада



Выводы





Выводы

- При рассмотрении коррозии в свинце можно не рассматривать свинец, так как он не влияет на коррозию, влияет только наличие кислорода в нем;
- Молекулярный кислород, растворенный в свинце, при приближении к поверхности железа или стали диссоциирует на атомарный кислород. После диссоциации кислород перемещается по кристаллической решетке по октаэдрическим межузельным положениям. При переходе из одного межузельного положения в соседнее происходит резкое уменьшение энергии;
- Системе, при нуле температур, в которой находится кристаллит железа, атом кислорода и хрома/алюминия на поверхности, выгодней находиться в состоянии, когда кислород создает связь с атомом хрома/алюминия;



Выводы

- На начальных этапах окисления железа или стали кислородом, рост оксидной пленки идет очень интенсивно. В дальнейшем рост оксида замедляется. Характер роста оксида у различных систем с разными концентрациями хрома/алюминия не меняется, меняется, только, скорость роста;
- На начальных этапах окисления на поверхности стали идет перестройка структуры железа в структуру вюстита;
- Облучение частицами не влияет на рост пленки на начальных этапах. Большая часть дефектов отжигается.